

Nieodłączną cechą otaczającej nas natury i techniki jest jej ogromna złożoność i różnorodność zachodzących w niej procesów. Można stwierdzić, że w otaczającym nas świecie nic nie jest niezmiennie. Nawet pozornie proste układy chemiczne czy biologiczne często charakteryzują się bardzo złożoną dynamiką. Ze względu na różnorodność zachowań i ogrom parametrów charakteryzujących każdy obiekt, wszechstronna analiza zjawisk mogących w nim wystąpić jest na ogół możliwa tylko przy użyciu odpowiednich narzędzi modelowania matematycznego i symulacji komputerowych. Stosując te narzędzia musimy jednak pamiętać, że model matematyczny jest tworem sztucznym utworzonym przez badacza, a zatem może mieć cechy, których badany obiekt rzeczywisty nie posiada. W efekcie konieczna jest weryfikacja wyników symulacji z rzeczywistością.

Stosunkowo nową koncepcją technologiczną w inżynierii chemicznej są tzw. wielofunkcyjne lub hybrydowe ziarna katalizatora. Umożliwiają one prowadzenie w pojedynczym urządzeniu kilku procesów fizycznych i chemicznych. Integracja reakcji chemicznej i adsorpcji produktu lub kilku reakcji chemicznych w pojedynczym reaktorze chemicznym zazwyczaj odbywa się w skali makro. Oznacza to, że procesy te zachodzą w mieszaninie ziaren adsorbentu i katalizatora lub mieszaninie ziaren różnych katalizatorów. Właściwością ziaren hybrydowych jest połączenie tych materiałów w mikroskali, a mianowicie w pojedynczym ziarnie. Taka synergia może w efekcie poprawić efektywność danego procesu. Złożoność mechanizmów zachodzących w reaktorach katalitycznych i adsorpcyjnych połączona z dynamiczną naturą ziaren sugeruje, że dynamika takich obiektów może być bardzo skomplikowana. Analiza dynamiki ziaren hybrydowych jest niezbędna, przede wszystkim ze względu na ich potencjalne zastosowanie do prowadzenia wielu procesów chemicznych.

Celem projektu jest poszerzenie wiedzy teoretycznej dotyczącej dynamiki wielofunkcyjnych ziaren katalizatorów porowatych oraz wybranych reaktorów katalitycznych i adsorpcyjnych. Wiedza ta jest potrzebna do dalszych badań teoretycznych i empirycznych nad zagadnieniami dotyczącymi projektowania katalizatorów wielofunkcyjnych, reaktorów adsorpcyjnych i katalitycznych oraz do doboru warunków pracy lub sterowania istniejącymi aparatami. Kompleksowa analiza dynamiki ziaren i reaktorów wielofunkcyjnych wymaga budowy złożonych modeli matematycznych uwzględniających najistotniejsze zjawiska fizykochemiczne i zastosowania metod numerycznych, dzięki którym można utworzyć programy do symulacji komputerowych. Symulacje dynamiki utworzonych modeli matematycznych zostaną wykonane w oparciu o wybrane metody aproksymacyjne służące to tzw. redukcji wymiaru modelu, których znaczący rozwój odnotowano w ostatnim dziesięcioleciu. Metody aproksymacyjne mają na celu zmniejszyć czas obliczeń zachowując jednocześnie ich dokładność. Teoretyczna ocena korzyści płynących z zastosowania ziaren hybrydowych uzupełniona będzie o weryfikację wyników symulacji numerycznych z literaturowymi danymi eksperymentalnym.